

DD8 单晶镍基高温合金热机械疲劳后 γ/γ' 界面 位错网产生内应力的计算 *

周 丽^{1,2)} 李守新¹⁾ 王跃臣¹⁾ 王中光¹⁾

1) 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016

2) 沈阳理工大学机械工程系, 沈阳 110168

摘 要 计算了 DD8 单晶镍基高温合金在同相 (IP) 和反相 (OP) 热机械疲劳 (TMF) 后 γ/γ' 相界面上产生的位错网的内应力. 结果表明: IP TMF 条件下, γ/γ' 相界面上产生的位错网可以释放掉大部分错配应力, 同时因位错网的存在导致了 γ' 沉淀相发生了明显的筏化现象. OP 条件下产生的层错未造成基体内应力分布的不同, 因此未发生 γ' 沉淀相的筏化.

关键词 单晶镍基高温合金, 热机械疲劳, 位错网, γ/γ' 界面, 内应力

中图分类号 TG132.3, TG113.25 文献标识码 A 文章编号 0412-1961(2005)03-0245-06

CALCULATION OF THE INTERNAL STRESSES AT THE γ/γ' INTERFACE OF DD8 SINGLE CRYSTAL NICKEL BASE SUPERALLOY AFTER THERMO- MECHANICAL FATIGUE

ZHOU Li^{1,2)}, LI Shouxin¹⁾, WANG Yuechen¹⁾, WANG Zhongguang¹⁾

1) Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

2) Department of Mechanical Engineering, Shenyang Institute of Technology, Shenyang 110168

Correspondent: ZHOU Li, Tel: (024)83978023, E-mail: lizhou@imr.ac.cn

Supported by National Key Basic Research and Development Programme of China

(No. G19990650)

Manuscript received 2004-04-29, in revised form 2004-08-18

ABSTRACT The internal stresses produced by dislocation networks at the γ/γ' interfaces in a single crystal nickel-base superalloy DD8 has been studied after in phase (IP) and out of phase (OP) thermo-mechanical fatigue (TMF) testing. The results indicate that one of the roles of the dislocation networks at the γ/γ' interfaces is to relax most of the misfit stress under IP TMF, on the other hand, the existence of the dislocation networks results in the directional coarsening of the γ' precipitates. While under the OP TMF, the internal stress in the matrix induced by stacking faults does not vary significantly, the γ' precipitates do not show direction coarsening in OP test.

KEY WORDS single crystal nickel base superalloy, thermo-mechanical fatigue, dislocation network, γ/γ' interface, internal stress

沉淀强化镍基高温合金主要包括两相, 一相为面心立方 (fcc) 结构的 γ 基体相, 另一相为均匀镶嵌在 γ 基体中的 $L1_2$ 结构的立方 γ' 沉淀相. 基体和沉淀相共格, γ 的 (100) 面平行于 γ' 的 (100) 面. 因 γ 和 γ' 的晶格常数不同, 故在 γ/γ' 的界面上会产生界面错配.

在高温下, 经过蠕变、拉伸和疲劳变形后, 沉淀强化镍基高温合金在 γ/γ' 相界面会产生位错网^[1-5], 这些位错网是在外加载荷和 γ/γ' 晶格错配的共同作用下产生的, 位错网对于释放由外加载荷和 γ/γ' 的晶格错配在相界面上引起的弹性应变起了很大作用. 文献 [2, 6] 认为, 在 γ/γ' 相界面上, 对于一根单独位错, 最有效的释放错配应变能的位错是刃型位错, 且 Burgers 矢量位于相界面上; 而一组位错最有效地释放相界面上错配应变能的组态是, 在 {001} 面上形成六角形位错网或在 {100} 面上形成四边形的位错网^[6]. 但是关于高温合金在热机械疲

* 国家重点基础研究发展规划资助项目 G19990650

收到初稿日期: 2004-04-29, 收到修改稿日期: 2004-08-18

作者简介: 周 丽, 女, 1972 年生, 博士生

劳后的位错组态和 γ' 沉淀相形貌的变化尚少见报道。

本文根据 Wang 等^[7,8]用 TEM 对经过热机械疲劳后的 DD8 单晶镍基高温合金的位错组态和 γ' 沉淀相的筏化行为进行的详细观察,通过编写 Matlab 程序计算了热机械疲劳后在 γ/γ' 相界面上产生的位错网的内应力,定性分析了位错网对于释放错配应变能及在筏化过程中所起的作用。

1 计算位错网产生的内应力

本文采用离散位错模型 (DDM) 计算了同相 (IP) 和反相 (OP) 热机械疲劳 (TMF) 后 γ/γ' 微观结构的内应力分布。离散位错模型计算的应力场是由单个位错的应力场经过一系列变换叠加而成的。由于每一条位错线都会在其周围产生应力场,而应力场中的每一点都可以用应力张量来表示,DDM 是将每条位错线附近的应力张量经过坐标变化以后统一到一个总体坐标系中,这样就可以把所有的位错线产生的应力叠加起来。Carry 等人^[9]首先运用 DDM 解释了 γ/γ' 微观结构的蠕变现象,Scheunemann-Frerker 等^[10]与 Probst-Hein 等^[11]运用 DDM 模型计算了排列在 γ/γ' 界面附近位错的应力状态。

1.1 观测结果

对热机械疲劳前、后的样品进行了 TEM 观察。疲劳前的 γ' 形貌如图 1。经过热机械疲劳 IP 实验条件后,在机械应变较小的样品中可以明显观察到 γ' 沉淀相的筏化(图 2a),且随着应变幅的变大, γ' 沉淀相筏化的程度变得越来越弱;而在 OP 实验条件下,所有应变幅下 γ' 沉淀相都没有变化,依然保持着立方形貌(图 2b)。

IP TMF 与 OP TMF 变形后的位错组态分别在图 3, 4 中给出。

IP TMF 形变后,在垂直于加载应力轴的 $(001)_{\gamma/\gamma'}$ 相界面上,观察到了密集六角形位错网(图 3a, b);而在平行于应力轴的 γ/γ' 相界面上观察到的却大多是四边形的位错网(图 3c)。经过对位错网中位错的分析表明,

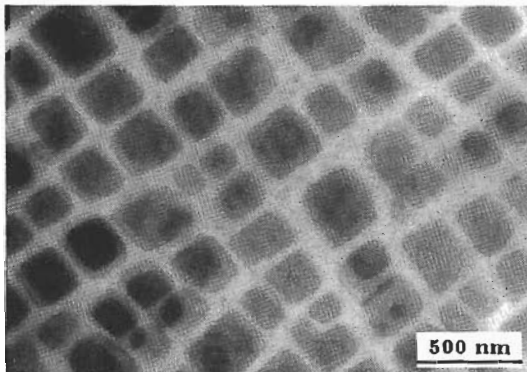


图 1 热机械疲劳前 γ' 沉淀相的透射电镜照片

Fig.1 TEM micrograph of γ' precipitates in DD8 single crystal Ni base superalloy before thermo-mechanical fatigue (TMF)

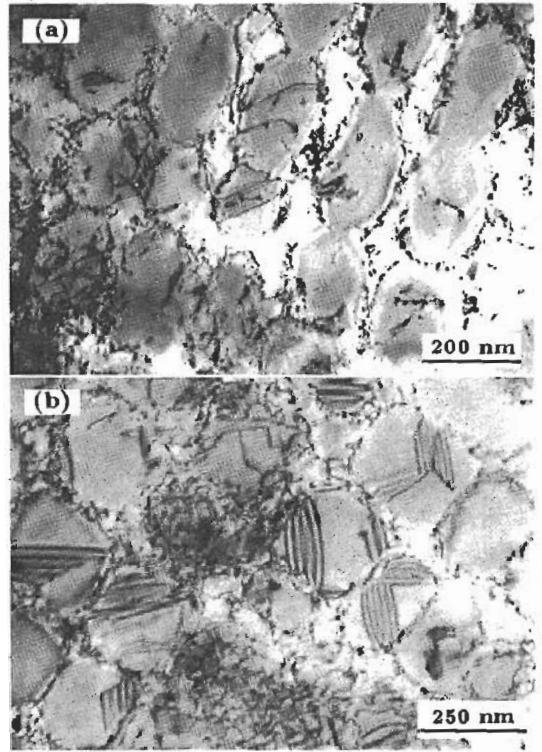


图 2 热机械疲劳后 γ' 沉淀相的透射电镜照片

Fig.2 TEM micrographs of γ' precipitates after in phase (IP) TMF (a) and out phase (OP) TMF (b), showing obviously rafting during IP TMF

在六角形位错网中,位错均为刃型位错;而在四边形位错网中的位错,既有螺型位错,也有混合位错。位错的 Burgers 矢量 \vec{b} 由 $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ 不显示准则确定,位错线方向利用两次投影解析法确定(见表 1)。

而经过 OP TMF 实验后,无论是在垂直于应力轴的 γ/γ' 界面上,还是在平行于应力轴的 γ/γ' 相界面上均未观察到位错网的存在。位错均匀地分布在 γ 基体内, γ' 沉淀相则被层错剪切。这些层错位于 $\{111\}$ 面上,主要的两种层错组态显示在图 4 中。由图 4a 可以看出,在 γ' 沉淀相中该层错尚未扩展到整个 $\{111\}$ 面上,而是终止在 γ' 晶粒中,因而层错的一个不全位错位于 γ' 中,而另一个不全位错则位于 γ/γ' 相界面上;由图 4b 可见,在 γ' 沉淀相中层错已经扩展到整个 $\{111\}$ 面上,层错边界的不全位错均位于 γ/γ' 相界面上。利用 TEM 的明场和中心暗场技术,分别对图中的层错进行了分析。Burgers 矢量和位错线方向亦见表 1。

1.2 模拟计算方法

为了分析位错网的应力状态,图 5 是 IP 和 OP TMF 后的位错组态示意图。图 5a 代表 IP TMF 过程中 γ/γ' 界面上产生的位错网,由于位错网分布及其结构的对称性,只需计算 1/8 体积的位错网产生的内应力,图 5b 代表 OP TMF 后在 $\{111\}$ 面上产生的层错结构,图中由 3 条位错线组成的大三角形表示在 γ' 沉淀相中该层错已经扩

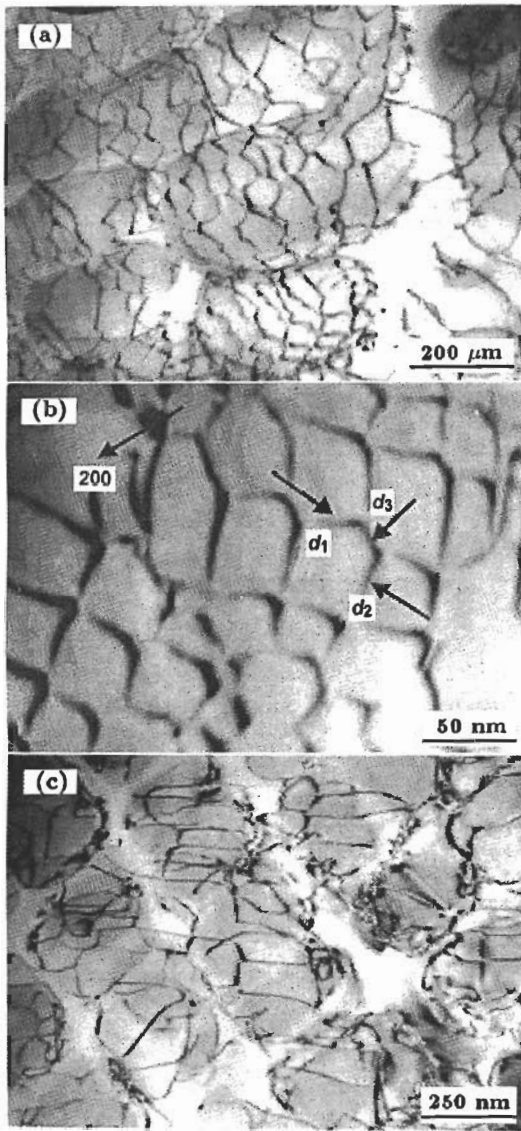


图 3 IP TMF 后垂直应力轴的 $(001)_{\gamma/\gamma'}$ 相界面上的密集六角形位错网、局部放大图及平行于应力轴的 γ/γ' 相界面上的四边形位错网

Fig.3 Dislocation configurations after IP TMF

(a) dense hexagonal dislocation networks existed on the $(001)_{\gamma/\gamma'}$ interfaces normal to the loading axis

(b) local magnification of Fig.3a

(c) rectangular dislocation networks existed on the γ/γ' interfaces parallel to the loading axis

展到了整个 $\{111\}$ 面上, 而 4 条位错线组成的位错组态表示该层错尚未扩展到整个 $\{111\}$ 面上. 在本文用到的 DDM 模型中, 最终的应力状态是由每一条位错线所产生的应力场叠加而成的.

为了获得一根刃型或螺型位错所产生的应力场, 应用线弹性理论的模型, 一根位错被放在一个空芯圆柱体的轴心, 该空芯圆柱体的内半径为 r . 由于靠近位错芯处具有强烈的非线性位移, 因此这一模型在 $|r| < r_c$ 的区域是无效的, 此处 r_c 为临界距离.

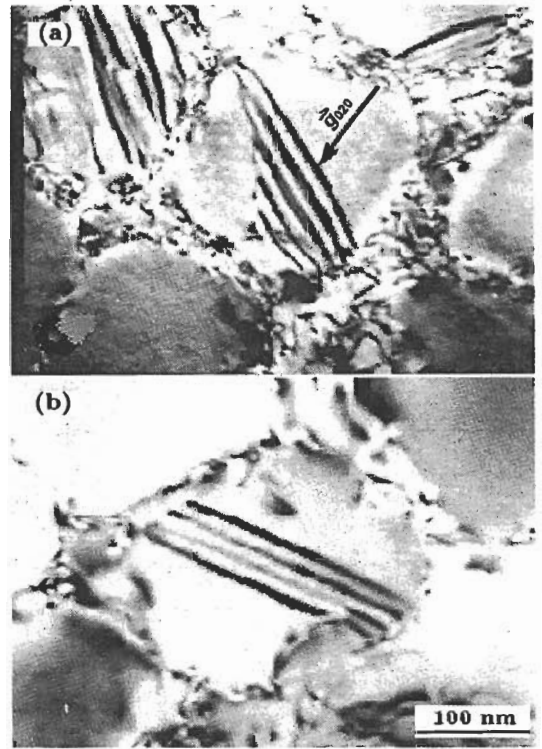


图 4 OP TMF 后 γ' 沉淀相内的层错组态

Fig.4 Stacking faults in γ' precipitates after OP TMF

(a) the fault did not extend over the entire $\{111\}$ plane in a γ' grain

(b) the fault extended over the entire $\{111\}$ plane in a γ' grain

对于一根沿 z 轴的无限长直刃型位错, 平面应变下, 位错芯近处的应力分量如下

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= -Ay(3x^2 + y^2)/(x^2 + y^2)^2 \\ \sigma_{yy} &= Ay(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2 \\ \sigma_{xy} &= Ay(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2 \\ \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

而对于一根沿 z 轴无限长直螺型位错, 在附近的应力分量如下

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xz} &= -(\mu b/2\pi)[y/(x^2 + y^2)] \\ \sigma_{yz} &= (\mu b/2\pi)[y/x^2 + y^2] \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中, $A = \mu b/2\pi(1 - \nu)$, 为一常量; μ 为切变模量; ν 为 Poisson 比; b 为 Burgers 矢量模, 临界距离 r_c 在 b 到 $10b$ 之间, 此处取 $r_c = 8b$.

对于每一条位错线, 其局部坐标系为: z_i 轴沿位错线方向, x_i 轴是其运动方向, 而 $y_i (i=1, 2, \dots, n)$ 轴沿垂直与 z_i 和 x_i 两轴的方向. 为了正确地分析所有位错在 γ 和 γ' 两相中产生的内应力的分布状态, 定义一个整体坐标系 (用 x', y', z' 表示, 如图 5 所示), 两坐标系的

表 1 同相、反相 TMF 后的位错线及 Burgers 矢量
Table 1 Dislocation lines and Burgers vector after in phase and out phase TMF testing

TMF way	γ/γ' interface	Dislocation type	Orientation of	Burgers	Angle between
			dislocation line \vec{s}	vector \vec{b}	\vec{s} and \vec{b} α , deg
IP	Horizontal interface	Edge	$\bar{1}10$	$(a/2)[110]$	90
		Edge	110	$(a/2)[\bar{1}10]$	90
		Edge	010	$a[100]$	90
	Vertical channel	Screw	011	$(a/2)[011]$	0
		Mixed	110	$(a/2)[10\bar{1}]$	60
		Mixed	$10\bar{1}$	$(a/2)[110]$	60
OP		Mixed	$\bar{1}10$	$(a/3)[\bar{2}1\bar{1}]$	30
		Mixed	011	$(a/6)[112]$	30
		Mixed	$\bar{1}10$	$(a/3)[\bar{2}1\bar{1}]$	30
		Edge	101	$(a/6)[010]$	90

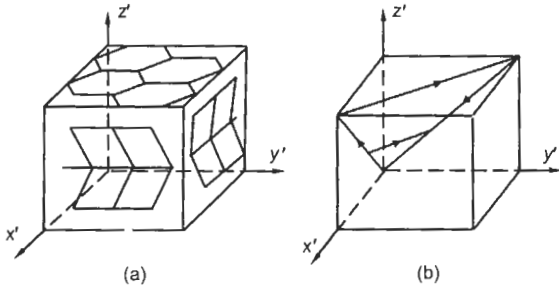


图 5 IP TMF 和 OP TMF 后的位错组态示意图

Fig.5 Schematic representations of dislocation configurations after IP TMF (a) and OP TMF (b)

表 2 整体坐标与局部坐标系的关系

Table 2 The relation between the global coordinate system and the local coordinate system

Global coordinate	Local coordinate		
	x_i	y_i	z_i
x'	l_{i1}	m_{i1}	n_{i1}
y'	l_{i2}	m_{i2}	n_{i2}
z'	l_{i3}	m_{i3}	n_{i3}

关系见表 2. 其中, l_{ij}, m_{ij} 和 $n_{ij}(i=1, 2, \dots, n, j=1, 2, 3)$ 为方向余弦. 如坐标系作平移变换, 同一点的各应力分量是不会改变的. 而当坐标作转轴变化时, 应力分量遵循的张量变换规律为

$$\sigma_{i'j'} = \sigma_{ij}n_{i'i}n_{j'j} \quad (3)$$

式中, $n_{i'i}$ 为 l_i, m_i 和 $n_i(i=1, 2, 3)$ 等 9 个量. $n_{i'i}$ 中, 下标 $i' = 1', 2', 3'$, 分别对应于新坐标 x', y', z' ; 而下标 $i=1, 2, 3$, 分别对应于老坐标 x, y, z . 如 $n_{2'3}$ 表示新坐标轴 y' 的单位矢量在老坐标轴 z 上的投影, 即方向余弦 n_2 . 另外, 用 σ_{yz}, σ_{xz} 和 σ_{xy} 分别表示 τ_{yz}, τ_{xz} 和 τ_{xy} .

σ_{ij} 中的变量应该是局部变量, 但最后要在总体坐标系下作图, 因此 σ_{ij} 中的局部变量要用总体坐标的变量表示, 又用到以下空间坐标系的转换公式

$$\left. \begin{aligned} x_i &= x' \cos(l_{i1}) + y' \cos(l_{i2}) + z' \cos(l_{i3}) + x_{i0} \\ y_i &= x' \cos(m_{i1}) + y' \cos(m_{i2}) + z' \cos(m_{i3}) + y_{i0} \\ z_i &= x' \cos(n_{i1}) + y' \cos(n_{i2}) + z' \cos(n_{i3}) + z_{i0} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

最后, 通过编写 Matlab 程序就可以计算出 γ 基体和 γ' 颗粒内的静水应力分布.

2 计算结果

图 6 为 IP TMF 条件下 γ 和 γ' 的静水压力分布图. 图 6a 示出 γ/γ' 界面上的静水应力 p 的分布情况, 从图可见, γ/γ' 水平界面受拉应力作用, 而垂直界面的静水应力值都很小, 且绝大部分为压应力, 同时水平界面的拉应力明显大于垂直界面压应力的绝对值. 图 6b 示出 γ 基体通道内的静水应力, 同样是水平通道内的静水应力大于垂直通道. 准 γ' 颗粒拐角处的压力值最大, 约为 1000 MPa. 这也与本文作者以前计算筏化的结果^[12,13]一致. 图 6c 示出 γ 基体和 γ' 颗粒内不同切面上的静水应力分布, 可见 γ' 颗粒内分布的均为压应力, 而基体通道内分布的是张应力.

图 7 计算的是 OP TMF 条件下, γ' 沉淀相中的层错尚未扩展到整个 $\{111\}$ 面时, γ 和 γ' 的静水应力 p 的分布图. 其中图 7a 示出 γ/γ' 界面上的静水应力分布情况, 从图中可以看出, γ/γ' 界面上所受的应力值都很小, 这主要是由于该计算模型中只计算了层错中的一条位错环产生的应力大小. 而且水平界面上静水应力的分布与垂直界面的基本相同. 图 7b 所示为 γ 基体通道内的静水应力, 水平通道的静水应力与垂直通道的静水应力分布也

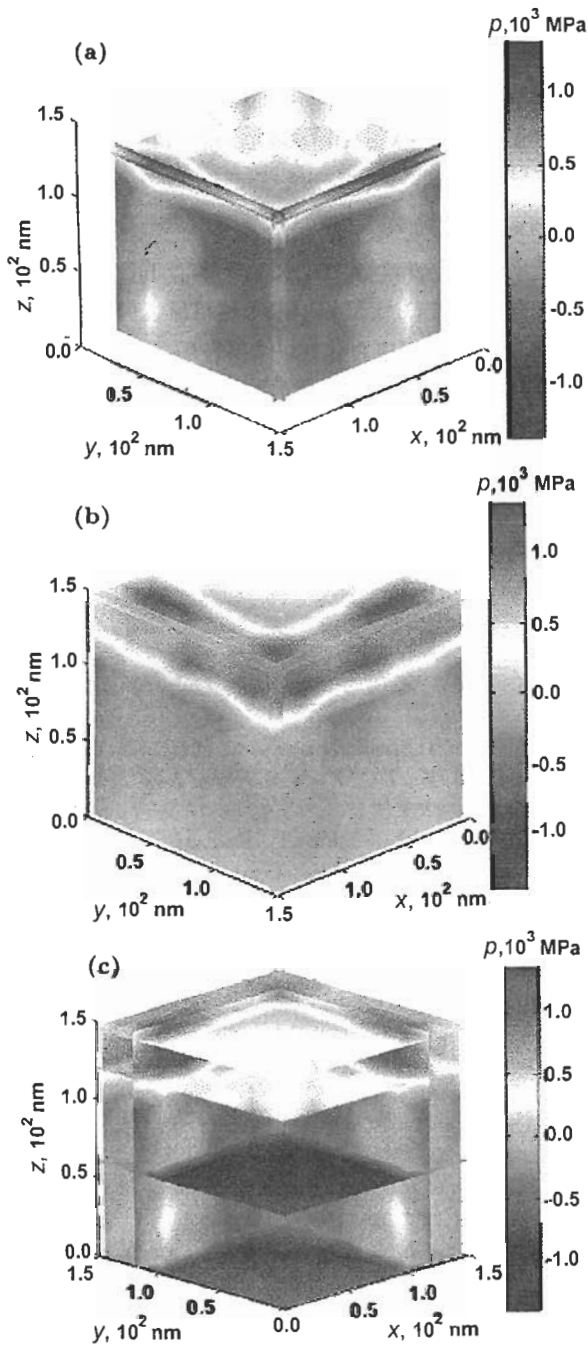


图 6 IP TMF 条件下 γ 和 γ' 的静水压力分布图

Fig.6 Distributions of hydrostatic pressure p under IP TMF testing

- (a) at the γ/γ' interfaces
- (b) at the γ channels
- (c) at the different sections of the γ' precipitate and γ channels

相同, 且与 γ/γ' 界面的分布情况基本类似. 为了与 IP TMF 相比较, 同样在 γ 和 γ' 颗粒内切了许多切平面 (如图 7c 所示), 可以看出 γ' 颗粒内的静水应力值要高于基体通道内的静水压力值, 但不是很明显. 在 OP TMF 条件下 γ' 沉淀相中层错扩展到整个 $\{111\}$ 面上的静水应力分布与未扩展到整个 $\{111\}$ 面上的情况基本相同.

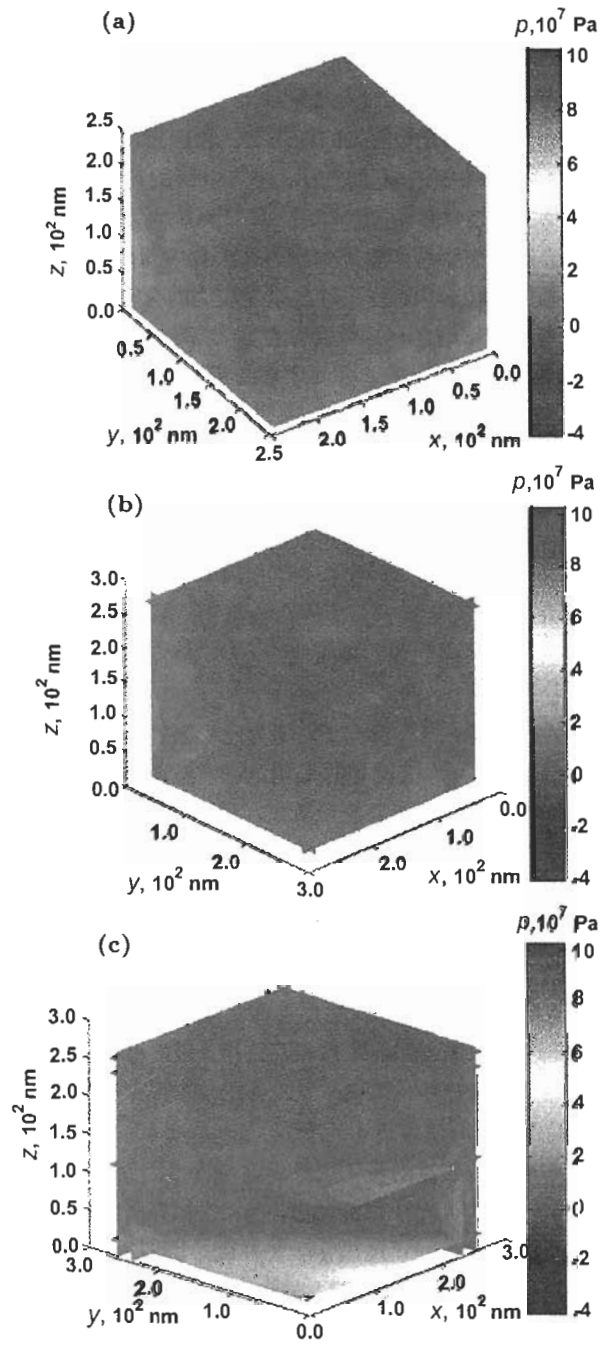


图 7 OP TMF 条件下 γ 和 γ' 的静水压力分布图

Fig.7 Distributions of hydrostatic pressure p under OP TMF testing

- (a) at the γ/γ' interfaces
- (b) at the γ channels
- (c) at the different sections of the γ' precipitate and γ channels

3 分析讨论

γ/γ' 界面上的刃型位错或混合位错可以松弛错配应力, 最有效的是 Burgers 矢量位于相界面上的刃型位错. 前已提及, 水平界面与垂直界面上形成的位错网明显不同; 水平界面上的位错均为刃型位错; 而垂直界面上的位错除了混合位错, 还有螺型位错. 而螺型位错对于释放内

应力的影响是非常小的. 位错网的不同直接体现在最终计算出水平界面与垂直界面上应力分布的明显不同.

对于一种负错配合金 (颗粒 γ' 相的晶格参数小于 γ 基体相), 在没有外应力的作用下, 颗粒相内承受的是拉应力, 而基体相内受压应力 (即为由错配产生的错配应力)^[12]. 通过计算得知, 经过 IP TMF 后, γ/γ' 相界面上分布的位错网产生的内应力在颗粒内为压应力, 而在基体相内为拉应力, 这正好与错配应力的分布相反, 说明该位错网的作用之一是可以释放掉大部分错配应力.

镍基高温合金经过 TMF 实验后, γ' 沉淀相也会在蠕变实验中一样出现筏化^[14,15]. Kraft 等人^[14]认为, 在 TMF 实验中 γ' 的筏化现象与在蠕变实验中出现的情况类似, 这主要与合金元素的高温扩散有关. 对于负错配合金 CMSX-6, 在实验的 100 周左右 γ' 沉淀相就会出现明显筏化. IP 实验中, 在高温半周试样受到的是拉应力, γ' 沉淀相垂直于应力轴筏化; 而 OP 实验中, 在高温半周试样受到的是压应力, γ' 沉淀相平行于应力轴筏化.

在本实验的 IP 情况下, 随着应变幅的降低试样的疲劳寿命变长, γ' 沉淀相的筏化也越来越明显. 这里也可以用能量的观点来解释筏化现象, 由于垂直于应力轴的界面上的六角形位错网可以释放掉大部分错配能, 虽然在平行应力轴的界面上也存在四边形位错网, 但这个位错网大多是由螺型位错构成的, 螺型位错的存在不能有效地减少界面的弹性能, 因此, 系统为了减小能量 (由于筏化的过程是能量减少的过程), 会尽可能的减少平行于应力轴的相界面, 使两个相邻的颗粒相互连接, 最终形成了垂直于应力轴的筏状组织, 这也与本工作的实验结果一致. 而在 OP 情况下, 即使在最小应变幅 ($\Delta\epsilon_m=1.4\%$) 下, γ' 沉淀相亦未出现明显的筏化现象, 这与许多因素有关.

Carry 等人^[16]曾经提出, γ/γ' 相界面上的位错能够在晶体内促成元素形成化学势梯度, 进而导致 γ' 沉淀相的筏化. Mardhand 等人^[15]在 TMF 中观察到, IP 实验中 γ' 沉淀相发生了明显的筏化, 在没有消失的 γ/γ' 相界面上存在着大量的位错网; 而在 OP 实验中则没有位错网出现, γ' 沉淀相也没有发生明显的筏化. Kraft 等人^[14]在 CMSX-6 的 TMF 中观察到, 无论是在 IP 还是在 OP 实验中 γ' 沉淀相都发生了明显的筏化, 在未消失的 γ/γ' 相界面上也发现了位错网的存在. Buffiere 等人^[17]对由刃型位错组成的 γ/γ' 相界面上的位错网中的各元素的密度进行了测定, 证实有位错附近 Co 和 Cr 的密度明显高于基体内, 而 Al、Ti 和 Ni 的密度变低, 这表明由刃型位错组成的位错网对元素的偏析确有一定的促进作用.

由以上的计算可进一步说明位错网的存在对 γ' 沉淀相的筏化起重要作用. 在 IP 实验中, 由于位错网的存在,

水平通道内的静水压力明显不同于垂直通道, 由文献 [12] 中讨论的筏化机制说明在 IP TMF 实验条件下, 筏化现象一定会发生. 而在 OP TMF 实验中, 既无位错网的出现, 亦未发现水平通道与垂直通道的应力差, 因此不会发生筏化现象.

4 结论

采用离散位错模型 (DDM) 计算了 DD8 单晶镍基高温合金在同相 (IP)、反相 (OP) 热机械疲劳 (TMF) 后 γ/γ' 微观结构的内应力分布. 结果表明:

(1) IP TMF 条件下产生的位错网一方面可以释放掉大部分由错配产生的错配应力, 另一方面水平通道与垂直通道的应力差导致 γ' 沉淀相发生了明显的筏化现象.

(2) OP TMF 条件下产生的层错没有造成基体内应力分布的不同, 因此, 在 OP 实验中没有发生 γ' 沉淀相的筏化.

参考文献

- [1] Weatherly G C, Nicheolson R B. *Philos Mag*, 1968; 17: 801
- [2] Lesalmonie A, Strudel J L. *Philos Mag*, 1975; 32: 937
- [3] Zhang J H, Hu Z Q, Xu Y B, Wang Z G. *Metall Trans*, 1992; 23A: 1253
- [4] Zhang J X, Murakumo T, Koizumi Y, Koizumi T, Kobayashi T, Harada H, Masaki S J R. *Metall Mater Trans*, 2002; 33A: 3741
- [5] Gabrisch H, Mukherji D, Wahi R P. *Philos Mag*, 1996; 74A: 229
- [6] Gabb T P, Draper S L, Hull D R, MacKay R A, Nathal M V. *Mater Sci Eng*, 1989; 118A: 59
- [7] Wang Y C, Li S H, Ai S H, Liu F, Zhou L, Zhang H. *Acta Metall Sin*, 2003; 39: 237
(王跃臣, 李守新, 艾素华, 刘峰, 周丽, 张辉. 金属学报, 2003; 39: 237)
- [8] Wang Y C, Li S H, Ai S H, Liu F, Zhou L, Zhang H. *Acta Metall Sin*, 2003; 39: 150
(王跃臣, 李守新, 艾素华, 刘峰, 周丽, 张辉. 金属学报, 2003; 39: 150)
- [9] Carry C, Dermarker S, Strudel J L, Wonsiewicz B C. *Metall Trans*, 1979; 10A: 855
- [10] Scheunemann-Frerker G, Muller L, Feller-Kniepmeier M. *Philos Mag*, 1993; 68A: 193
- [11] Probst-Hein M, Dlouhy A, Eggeler G. *Acta Mater*, 1999; 47: 2497
- [12] Zhou L, Li S X, Chen C R, Wang Y C, Zang Q S, Lu K. *Z Metallkd*, 2002; 4: 315
- [13] Zhou L, Li S X, Chen C R, Wang Y C, Zang Q S, Lu K. *Mater Sci Eng*, 2003; A352: 300
- [14] Kraft S, Altenberger I, Mughrabi H. *Scr Metall Mater*, 1995; 32: 411
- [15] Mardhand N, Éspérance G L, Pelloux M. *ASTM STP 942*, 1988: 638
- [16] Carry C, Srudel J L. *Acta Metall*, 1977; 25: 767
- [17] Buffiere J Y, Chegnet M C, Ignat M. *Scr Metall Mater*, 1996; 34: 349